

Особенности инкапсуляции нуклеотидов в матрице углеродной нанотрубки с наночастицами из золота

Научный руководитель – Холмуродов Mirzoaziz Тагойкулович

Хусенов Мирзоазиз Ашурович

Кандидат наук

Таджикский технический университет имени М. Осими, Факультет информационных технологий и коммуникаций, Кафедра автоматизированные системы обработки информации и управления, Душанбе, Таджикистан

E-mail: mirzo85@inbox.ru

В работе выполнено молекулярно-динамическое (МД) моделирование для исследования процессов транспорта и динамических изменений нуклеотида (Н), взаимодействующего с наночастицами (НЧ) из золота, внутри матрицы углеродной нанотрубки (УНТ). С применением компьютерных расчетов и метода МД-моделирования изучены динамические и структурные особенности процессов взаимодействия Н-НЧ, происходящих внутри матрицы УНТ. Исследования тройной системы Н-НЧ-УНТ может послужить основой для понимания более сложных явлений, упомянутых выше: транспортировка биомолекул или доставка лекарств внутри живых клеток, инкапсуляции ДНК и белков и т.д., внутри ограниченной геометрии УНТ, происходящих с участием металлических и интерметаллических НЧ (золота, серебра, железа, магния, гадолия и др.). Углеродные нанотрубки - цилиндрические кристаллы, состоящие из одних лишь атомов углерода - благодаря многим своим уникальным свойствам рассматриваются в качестве замены металлических проводников в микро-нано-электронике новых поколений. Открытие УНТ относится к наиболее значительным достижениям современной науки и их исследования, применения представляют значительный фундаментальный и прикладной интерес [1,2]. Широкое применение УНТ нашли в биомедицине, а также в сфере телекоммуникаций, в производстве осветительных устройств, используются в качестве усилителя каталитических свойств, т.д. [1,2]. Проводятся исследования по росту нанотрубок из живых клеток, что говорит об отсутствии токсического эффекта. Клетки не срачиваются с нанотрубками из углерода, и это дает возможность создания протезов и хирургических имплантов на основе УНТ. Было также продемонстрировано, как отдельная спираль ДНК была присоединена к УНТ а затем введена в живую клетку, что может быть использовано в генной терапии. Недавно продемонстрировано использование УНТ как сенсоров, определяющих воздействие лекарств на раковые клетки или определяющих наличие повреждающих ДНК веществ. Другое применение нанотрубок связано с использованием их как транспортных средств, поставляющих лекарственные вещества в нужное место организма, хотя механизмы проникновения УНТ в клетки все еще не понятны. В данной работе выполнено МД-моделирование с целью исследования процессов транспорта и динамических изменений нуклеотида - молекулы, как составной части ДНК и РНК [3-6] и состоящей из нескольких связанных атомов - С, О, Н, Р, N, взаимодействующих с наночастицами из золота внутри матрицы УНТ. Небольшая нуклеотидная цепочка представляет собой важное звено в исследовании молекулярных структур и процессов взаимодействия молекул ДНК или РНК с металлическими НЧ и УНТ. Известно, что первичные структуры ДНК и РНК состоят из линейной последовательности нуклеотидов, связанных друг с другом фосфодиэфирной связью. На сегодняшний день нуклеиновые кислоты являются мощным инструментом нанотехнологий и электронной промышленности. Результаты МД моделирования и их обсуждения

Результаты МД-моделирования, приведенные ниже,

указывают на особенности взаимодействия и образования связей нуклеотидной цепочки с наночастицами из золота, процессов сворачивания нуклеотида внутри УНТ. Одним из наших центральных наблюдений явилось детальное изучение процессов взаимодействия Н-НЧ на атомно-молекулярном уровне. При этом выявлены особенности процессов образования и разрушения связей Н-НЧ, происходящих в ограниченной матрице УНТ [3-6]. Образование устойчивой долгоживущей связи Н-НЧ или её разрушение происходит как результат взаимной конкуренции внутримолекулярных сил нуклеотидной цепочки со слабыми силами Ван-дер-Ваальсовой природы со стороны НЧ золота.

МД расчеты проводились с помощью многоцелевого программного пакета DL_POLY. Тройная система Н-НЧ-УНТ смоделирована несколькими видами потенциалов взаимодействия. Прежде всего, нуклеотидная цепочка обладает широким с Таким образом, моделирование тройной системы Н-НЧ-УНТ выполнено с использованием трех видов приближений: (1) классическое потенциальное поле наночастиц золота; (2) классико-квантовое поле нуклеотидной цепочки; (3) квантово-классическое поле углеродной нанотрубки. Результаты МД моделирования системы Н-НЧ-УНТ приведены ниже с помощью снапшотов (рис. 2(а-в) и 3(а-в)). Из рис. 2(а-в) видим, что для системы Н-3НЧ-УНТ возможно образование стабильной связи между нуклеотидом и кластером из 3-х НЧ золота. Как видно из рис. 2(а-в), нуклеотид всегда остаётся в зоне взаимодействия ВдВ силы 3НЧ. Соотношение радиуса ВдВ для нуклеотида и 3НЧ всегда $R \sim R_{VdW}$, где R - расстояние между Н и 3НЧ золота. Для одной НЧ, как видно из рис. 3(а-в), соотношение расстояния Н-1НЧ и радиуса сил ВдВ $R \gg R_{VdW}$ ($R_{VdW} = [6-8] \text{ \AA}$). Таким образом, для 1НЧ золота не представляется возможным образовать сильную стабильную связь Н-1НЧ. Внутримолекулярные вибрации Н доминируют над слабыми силами ВдВ между Н-1НЧ, обусловленными влиянием ограниченной матрицы УНТ.

Заключение Тройная система Н - НЧ УНТ обеспечивает существенную возможность для исследования широкого круга теоретических и прикладных проблем в биоинженерии, бионанотехнологии, а также в медицине - в дизайне нанороботов для целей доставки лекарств внутри живой клетки. Исследования тройной системы Н-НЧ-УНТ может послужить основой для понимания более сложных явлений, - транспортировки биомолекул или доставки лекарств внутри живых клеток, инкапсуляции ДНК и белков, т.д., внутри ограниченной геометрии УНТ, происходящих с участием металлических и интерметаллических НЧ (золота, серебра, железа, магния, гадолиния и др.).

Источники и литература

- 1) 1. Харрис П. Углеродные нанотрубки и родственные структуры, Новые материалы XXI века. - М.: Техносфера, 2003, 336 с.
- 2) 2. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки, Строение, свойства и применения. - М.: Лаборатория знаний, 2006, 294 с.
- 3) 5. Khusenov M., Dushanov E., Kholmurodov K. Molecular Dynamics Simulations of the DNA-CNT Interaction Process: Hybrid Quantum Chemistry Potential and Classical Trajectory Approach. – J. of Modern Physics, 2014, v5, pp. 137-144.

Иллюстрации

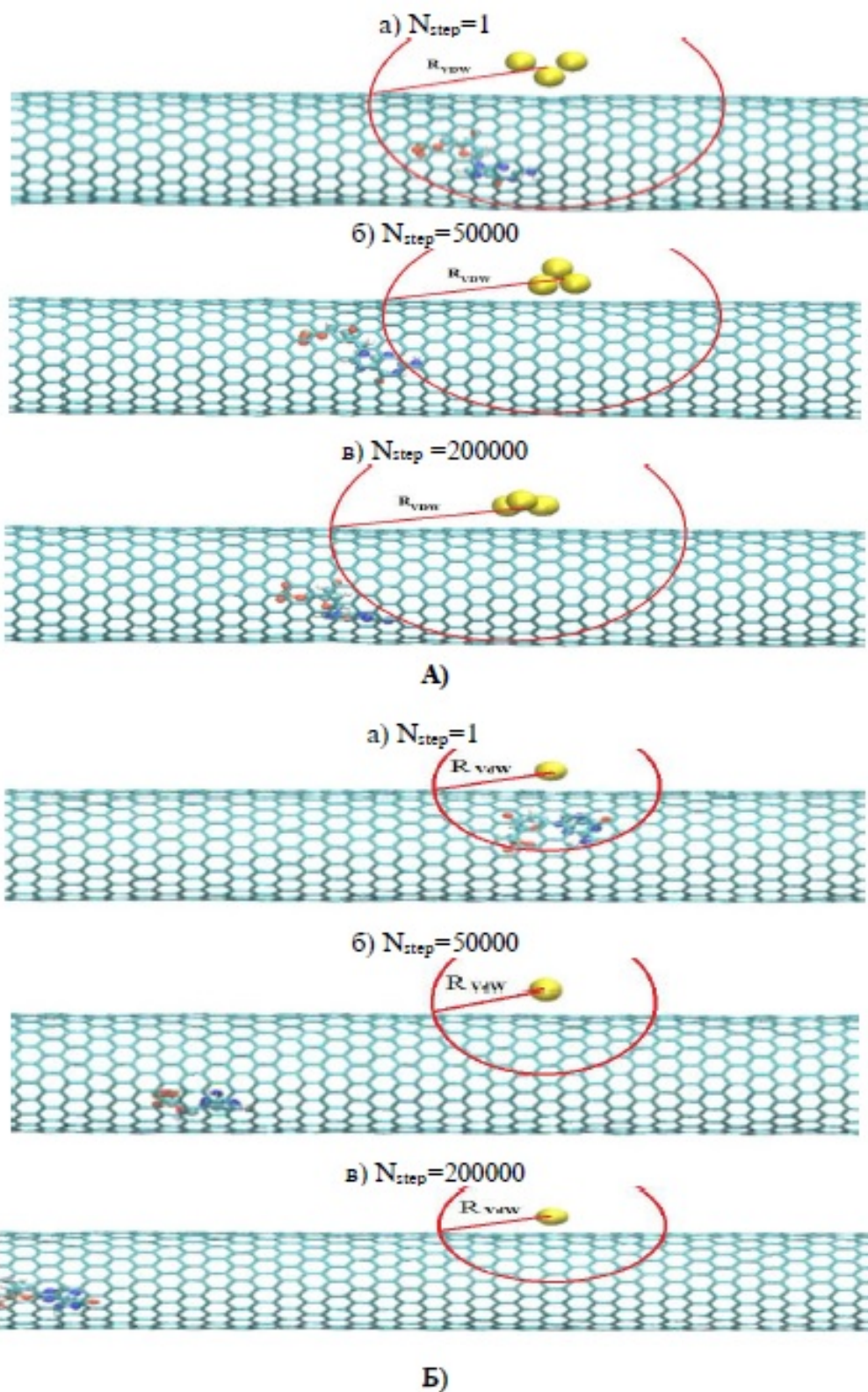


Рис. 1. А) (а-в). Последовательные конфигурации процесса взаимодействия динамических изменений и образования связей Н-ЗНЧ внутри матрицы УНТ. Б) (а-в). Последовательные конфигурации процесса взаимодействия динамических изменений и образования связей Н-1НЧ внутри матрицы УНТ. Как видно из рисунка, соотношение радиуса сил ВдВ для Н-1НЧ $R \gg R_{vdW}$, где R -расстояние Н-1НЧ ($R_{vdW} = [6-8] \text{ \AA}$).